



TITLE:

Th\_3P\_4型ウラン・プニクタイト  
の磁気異方性とp-f混成模型(XI. Uプ  
ニクタイトの物性,価数揺動状態の  
総合的研究,科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

竹ヶ原, 克彦; 柳瀬, 章; 糟谷, 忠雄

---

CITATION:

竹ヶ原, 克彦 ...[et al]. Th\_3P\_4型ウラン・プニクタイトの磁気異方性とp-f混成模型(XI. Uプニクタイトの物性,価数揺動状態の総合的研究,科研費研究会報告). 物性研究 1982, 37(5): 150-162

ISSUE DATE:

1982-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/90446>

RIGHT:

## §1. アクチノイド原子, イオン, 化合物

周期表の children と呼ばれる アクチノイド 元素と 希土類 元素は, お互いに 物理的・化学的性質に類似点が多い。しかし, これらの化合物の磁気的性質を担うのはアクチノイド化合物では5f電子であり希土類化合物では4f電子である。まず5f電子と4f電子の相違点を調べよう。i) 動径方向の電荷密度は, 5f状態が節をもつことから5f電子の方が4f電子より, より空間的に広がっている<sup>1)</sup>(図1)。従って内殻電子のs, p(アクチノイドでは6s, 6p, 希土類では5s, 5p)電子の空間的広がりに対して5f電子の方がより近い<sup>1,2)</sup>(図2, 3)。ii) 酸化数(イオン価数)を見ると, 希土類では+3価が安定でありほかに+2価と+4価のイオン

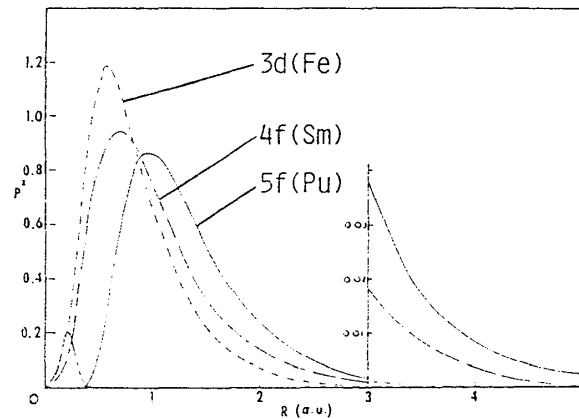


図1. それぞれの原子の動径電荷密度の比較.

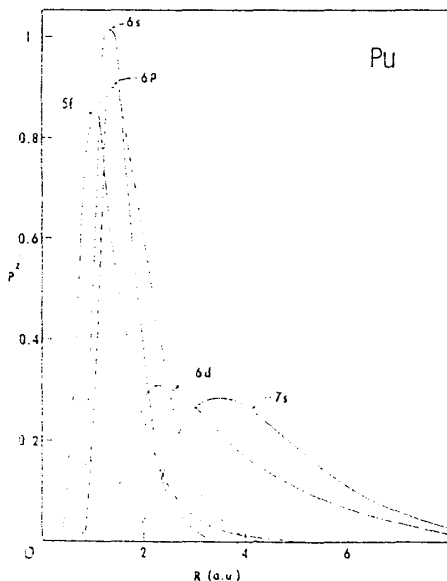


図2. Pu原子( $f^5 d^1 s^2$ )の動径電荷密度.

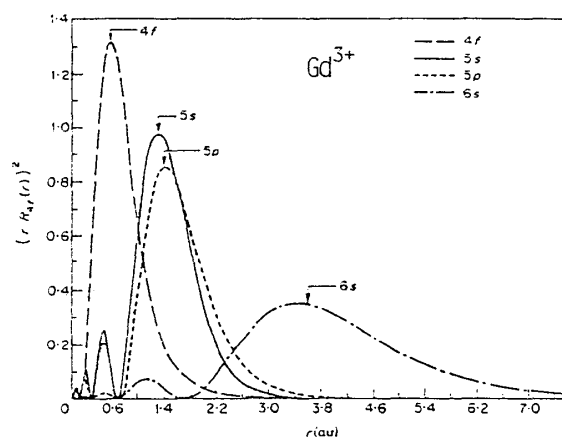


図3. Gd<sup>3+</sup>イオンの動径電荷密度.

状態が存在する。これに対しアクチノイドでは種々の酸化数の状態が存在し<sup>3)</sup>,むしろ遷移金属イオンに近い。例えば,ウラン・イオンでは+3価から+6価まで存在し,従って化合物中のイオン価数を決めるのが一つの問題となる。iii) アクチノイドではスピン-軌道相互作用が大きいことから,自由イオンの波動関数は中間結合で扱わねばならない。しかし,その結果<sup>4)</sup>(表1)を見ると,基底状態に限るなら第零近似としてRussell-Saunders結合の基底状態で扱うことができる。

表1. 自由イオンの波動関数. Russell-Saunders結合では,  $5f^2$  の場合基底状態は  $^3H_4$ , 第1励起状態は  $^3H_5$ ,  $5f^3$  では基底状態は  $^4I_{9/2}$ , 第1励起状態は  $^4I_{7/2}$  となる。

Configuration	J	E (cm <sup>-1</sup> )	Major SL components
$5f^2$ (U <sup>4+</sup> )	4	0	89% $^3H_4$ ; 10% $^1G_4$
	2	3735.8	90% $^3F_4$ ; 9% $^1D_2$
	5	5118.3	100% $^3H_5$
	3	7518.5	100% $^3F_2$
	4	7748.8	47% $^3F_4$ ; 44% $^1G_4$
	6	9555.2	95% $^3H_6$
	4	13719.3	52% $^3F_2$ ; 45% $^1G_2$
	0	14161.7	95% $^3P_0$ ; 5% $^1F_3$
$5f^3$ (U <sup>3+</sup> )	6	0	83% $^4I_3$ ; 15% $^2H_3$
	$\frac{15}{2}$	4278.4	95% $^4I_1$
	$\frac{13}{2}$	7377.7	64% $^4F_3$ ; 25% $^2D_3$
	$\frac{11}{2}$	7948.8	92% $^4I_1$
	$\frac{9}{2}$	9490.9	38% $^2H_3$ ; 33% $^2G_3$ ; 12% $^4I_1$ ; 11% $^4F_3$
	$\frac{7}{2}$	10194.0	72% $^4F_3$ ; 13% $^4G_3$ ; 5% $^2F_5$
	$\frac{5}{2}$	11128.3	80% $^4I_1$ ; 18% $^2K_1$
	$\frac{3}{2}$	11322.1	63% $^4S_3$ ; 22% $^2P_1$ ; 14% $^4F_3$
	$\frac{1}{2}$		
	$\frac{1}{2}$		

アクチノイド化合物の物理的研究は最近多くなされている。中でも特にウラン化合物の研究が盛んである(§5参照)。表2にウラン・プニクタイトとウラン・カルコゲナイドの磁性をまとめた。秩序状態は強磁性及び反強磁性を示すが,  $U_3P_4$ ,  $U_3As_4$  では non-collinear である<sup>5)</sup>,  $UAs$ ,  $USb$  では multi- $k$  structure を示す<sup>6)</sup>等多彩であるが, いづれも磁気異方性が非常に大きい。秩序温度は100 Kから200 K程度で希土類化合物に比べてかなり高温である。また秩序モメントの大きさはUイオンが+4価であり+3価でありRussell-Saunders結合から予想される値よりかなり小さい(約半分程度)。

今回はこれらの化合物の中でも  $Th_3P_4$  型構造をもつウラン・プニクタイト ( $U_3X_4$ ,  $X = P, As, Sb, Bi$ ) について考察する。この物質を取扱う理由

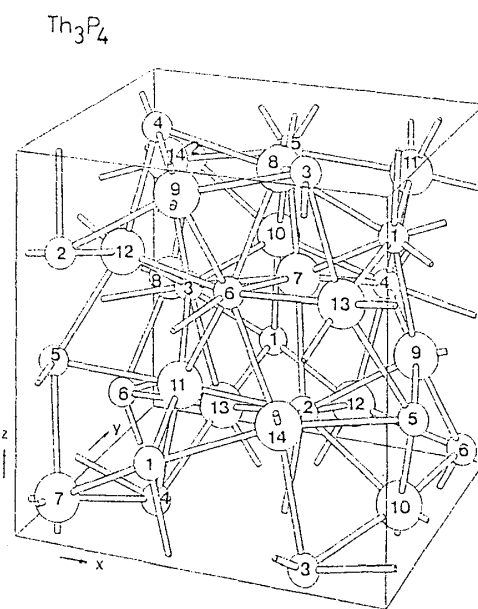
表2. ウラン化合物の磁性(文献は§5参照)

Compound	Magnetism	Ordering temperature (K)	$\theta_p$ (K)	Magnetic moment ordered ( $\mu_B/U$ )	Magnetic moment paramagnetic ( $\mu_B/U$ )
$U^{4+}$ ( $5f^2$ S=1 L=5 J=4)				3.20	3.58
Th <sub>3</sub> P <sub>4</sub> -type					
U <sub>3</sub> P <sub>4</sub>	F	140	140	1.55	2.75
U <sub>3</sub> As <sub>4</sub>	F	196	200	1.71	2.94
U <sub>3</sub> Sb <sub>4</sub>	F	149	150	1.60	3.04
U <sub>3</sub> Bi <sub>4</sub>	F	112	110	1.43	3.14
Anti-Fe <sub>2</sub> As-type					
UP <sub>2</sub>	AF +---	202	80.5	2.0	2.29
UAs <sub>2</sub>	AF +---	273	34	1.6	2.94
USb <sub>2</sub>	AF +---	205	18	1.9	3.04
UBi <sub>2</sub>	AF +---	180	-53	2.1	3.40
UPS	F	118	120	0.8	2.1
UPSe	F	110	90	0.9 - 1.35	2.4
UAsS	F	128	-380	1.1 - 1.2	3.34
UAsSe	F	118	-195	1.4 - 1.5	3.41
USbSe	F	127	115	1.5	2.6
NaCl-type					
UN	AF I	53	-247	0.75	2.66
UP	AF I	122.5	13	2.0	3.35
UAs	AF I	127	59	2.24	3.4
	AF IA	66			
USb	AF I	214	140	2.82	3.64
US	F	177	180	1.70	2.2
USE	F	160	160	2.0	2.5
UTe	F	102	140	2.25	2.8
CaF <sub>2</sub> -type					
UO <sub>2</sub>	AF	30.8	-220	1.74	3.2
$U^{4+}$ ( $5f^2$ S=1 L=5 J=4)				3.20	3.58
$U^{3+}$ ( $5f^3$ S=3/2 L=6 J=9/2)				3.27	3.62

として, i) ウランの価数がはっきりしている。即ち5f電子がかなり局在しているものと思われる。ii) Ceモノプロタイトとの類推ができる。CeSbとCeBiの示す種々の異常な磁気的性質が我々のp-f混成模型で説明され<sup>7)</sup>, このp-f混成模型の有効性が広く認められている。従ってU<sub>3</sub>X<sub>4</sub>にもこのp-f混成模型を適応し, 解析を進める。iii) 良質の単結晶が入手できることから<sup>8)</sup>, 実験理論が協力して研究を進めることができる。

## §2. $\text{Th}_3\text{As}_4$ 結晶の電子構造

$\text{Th}_3\text{P}_4$  型結晶構造は体心立方格子であり、単位格子に4分子を含む複雑な構造である(図4)。 $\text{Th}$ は+4価、 $\text{As}$ は-3価の価数が安定であるから、 $\text{Th}_3\text{As}_4$ は絶縁体もしくは半導体的電子構造をもつものと予想される。実際 local-spin-density 近似でポテンシャルを自己無撞着に定める APW 法によるバンド計算の結果はバンド・ギャップ $^{\circ}$ を生じる<sup>9)</sup>(図5)。伝導帯の底は $\Gamma$ -点にあり、価電子帯のトップは $\text{H}$ -点にあり、その間のギャップ $^{\circ}$ は約



○ Th      ○ P

図4.  $\text{Th}_3\text{P}_4$  型結晶構造。原子につけた番号はWyckoffによる<sup>23)</sup>。

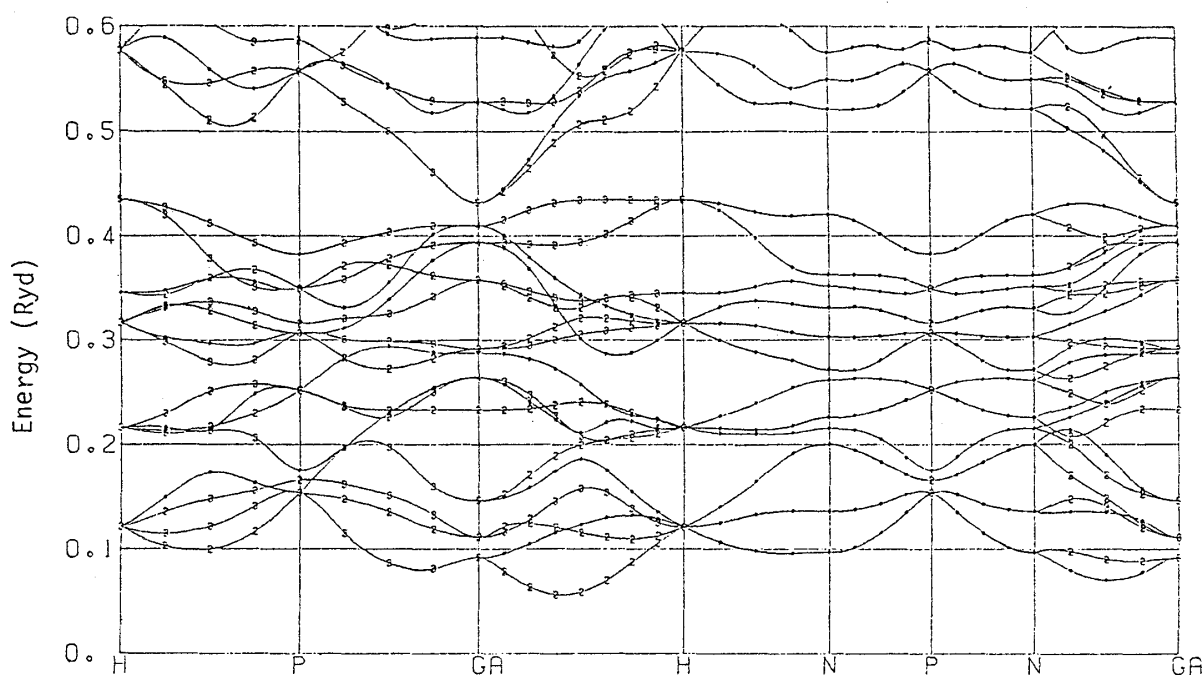


図5.  $\text{Th}_3\text{As}_4$  の電子構造。この図は予備的な計算結果であり、精度を上げた計算結果ではギャップ $^{\circ}$ は約0.5eVとなるが、全体的にはほとんど変化がない。

0.5 eV である。一方  $\text{Th}_3\text{As}_4$  の電気抵抗の測定では  $n$ -型の伝導で活性化型の温度変化を示し、活性化エネルギーは 0.44 eV である<sup>10)</sup>。

$\text{Th}_3\text{As}_4$  結晶で  $\text{Th}$  を  $\text{U}$  で置換した系  $(\text{Th}_x\text{U}_{1-x})_3\text{As}_4$  ではホール係数より得られるキャリア数は  $x$  が 1 から 0.85 まで変化する間に  $10^{17}\text{cm}^{-3}$  から  $10^{19}\text{cm}^{-3}$  に変化する<sup>10)</sup>。このことは  $\text{U}$  イオンは +4 価で存在し、フェルミ準位下の 5  $f$  状態と価電子帯との  $p$ - $f$  混成により  $H$ -点近傍の価電子帯が押し上げられ、系が半金属的になったことによりキャリア数が増加したことを示している。 $\text{U}_3\text{P}_4$ ,  $\text{U}_3\text{As}_4$  ではド・ハース-ファン・アルフエン効果の測定が報告されている<sup>11)</sup>。フェルミ面の体積は  $\text{U}_3\text{X}_4$  当り数%の電子数も示しているが、測定がまだ不十分である。 $\text{U}_3\text{P}_4$ ,  $\text{U}_3\text{As}_4$  で電気抵抗の実験があり、室温ではそれぞれ約  $250\mu\Omega\text{cm}$  と  $500\mu\Omega\text{cm}$  であり Curie 温度 ( $T_c$ ) 以下で抵抗が減少するが、減少の程度が小さく、約  $T_c/3$  以下で急激に減少する<sup>12)</sup>。また  $T_c$  以下では抵抗の異方性も存在する<sup>13)</sup>。これらのことから秩序状態は単純な強磁性状態ではないと考えられる。また秩序の機構も通常な単純な交換相互作用型とは異なると考えられる。

### § 3. $\text{U}_3\text{X}_4$ 結晶の磁気的性質の特徴

前節  $(\text{Th}_x\text{U}_{1-x})_3\text{As}_4$  の考察から  $\text{U}_3\text{X}_4$  でも  $\text{U}$  イオンは +4 価で存在すると考えられ、中性子散乱の実験では磁気的形狀因子は +4 価で Russell-Saunders 結合の基底状態 ( $5f^2$ ;  $S=1$ ,  $L=5$ ,  $J=4$ ,  $g=0.8$ ) でよく説明できることが報告されている<sup>5)</sup>。従って、以下の議論では、 $\text{U}$  イオンは +4 価で Russell-Saunders 結合で考察する。磁気的性質の特徴を列挙する。

i) 表 2 からわかる様に、強磁性秩序状態の秩序モメントの大きさが、 $J=4$  から予想される値 ( $gJ=3.2\mu_B/\text{U}$ ) の約半分である。

ii) 非常に大きな磁気異方性が存在し、容易軸は  $\langle 111 \rangle$  方向である<sup>14)</sup>。これ以外の方向の磁化の大きさは、容易軸方向の磁化の方向余弦の大きさである。

iii) 単位格子中12個のUイオンは局所点対称性より3種類に分けられる。各々は、 $x$ ,  $y$ ,  $z$ 軸に対して  $S_4$  対称性を持ち、後から示すがそれぞれの軸方向が一軸性容易軸となっている。中性子散乱の実験で決められた秩序状態は、3種類のUイオンのモーメントの方向は、それぞれの容易軸の方向と  $\langle 111 \rangle$  方向の中間に向いている。モーメントが  $\langle 111 \rangle$  方向となす角は  $U_3P_4$  で  $13^\circ$ ,  $U_3As_4$  で  $25^\circ$  である<sup>5)</sup>。

iv) 以上の様なモーメントの大きさ及び秩序状態にもかかわらず、容易軸方向 ( $\langle 111 \rangle$  方向) の強い外部磁場の下での磁化の増加が非常に小さい。例えば8Tの外場での磁化の増加は  $U_3P_4$  で1.2%,  $U_3As_4$  で0.7%程度と小さい<sup>8,15)</sup>。

v)  $U_3As_4$  では困難軸である  $\langle 001 \rangle$  方向に強い外部磁場を加えると磁化が不連続に増加する spin orientational transition が生じる<sup>16)</sup>。この転移は40Kでは20Tで生じ温度が上昇するにつれて弱磁場方向にずれる。またこの転移は外場の方向に非常に敏感である。

vi) 低温で外部磁場の下での磁化の温度変化が非常に異常である。詳細は当報告書の鈴木達の報告を見られたい<sup>8,15)</sup>。

以上の様な特徴を説明するため、ポーランドのグループによるいくつかの理論計算が報告されている。1971年、点電荷模型による結晶場が計算されたが、これは局所対称性を  $S_4$  対称性ではなくより簡単な  $D_{2d}$  対称性で計算したものである<sup>17)</sup>。次いで結晶場と Heisenberg 型交換相互作用のある系が分子場近似で取扱われた<sup>18)</sup>。しかし上記ii)に対応する様に有効スピンを導入して議論しているが、上記の特徴を無撞着に説明できない。このことは、単純な交換相互作用では良くないためであり、複雑な交換相互作用を導入するにしても自由度が多すぎる困難がある。むしろ交換相互作用の起源を考えた場合は、 $p$ - $f$  混成模型で扱った方がより良いものと考えられる。

## §4. p-f混成模型<sup>19)</sup>

p-f混成効果をCeモノプロニクタイトの場合と比較する。p-f混成行列要素の大きさは、5f状態が4f状態に比べて空間的により広がっていることから、またU-プロニクタイトの距離がCe-プロニクタイトの距離に比べて短いこと(U-P: 2.84 Å, U-As: 2.95 Å, Ce-Sb: 3.21 Å, Ce-Bi: 3.25 Å)から、p-5f混成がp-4f混成よりかなり大きくなる。またp-f混成模型で重要な働きをする価電子帯のホール数はCeSb, CeBiではプロニクタイト当たり3~5%であるが、U<sub>3</sub>X<sub>4</sub>では約10%程度と予想される。従ってU<sub>3</sub>X<sub>4</sub>ではp-f混成効果がCeモノプロニクタイトより、より強められる。但しCeモノプロニクタイトではf電子数がCe当たり1個でかつ結晶構造が単純であることから取扱いは容易であるが、U<sub>3</sub>X<sub>4</sub>ではf電子数がU当たり2個でかつ結晶構造が複雑なため取扱いがかなり面倒になり、また計算結果の解析も手数がかかる。

尚、以下の計算は§2で述べたバンド計算の結果が出る前に行ったものであり、従ってバンド計算の結果は用いていない。

### §4-1. 常磁性領域

#### 1° 点電荷模型による結晶場

ウランのまわりの局所点対称性は $S_4$ であることから、結晶場ポテンシャルはWybourneの教科書の記号<sup>20)</sup>を用いて次の様に書ける。

$$V_{pc} = \frac{e^2 \langle r^2 \rangle}{a^3} A_{20} C_{20} + \frac{e^2 \langle r^4 \rangle}{a^5} [A_{40} C_{40} + A_{44} C_{44} + A_{44}^* C_{4-4}] \\ + \frac{e^2 \langle r^6 \rangle}{a^7} [A_{60} C_{60} + A_{64} C_{64} + A_{64}^* C_{6-4}] \quad (1)$$

但し  $C_{lm} = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}$ ,  $a$ : 格子定数

この表式は、 $z$ 軸のまわりに $S_4$ 対称性をもつウランの位置についてである。U<sup>4+</sup>, X<sup>3-</sup>イオンとして全イオンからの寄与を求めた。次に $\langle r^l \rangle$ として、



計算値<sup>21)</sup>を用い, また $\Gamma$ -ポイントとしてAsの場合の格子定数を用いると  
係数

$$B_{lm} = \frac{e^2 \langle r^l \rangle}{a^{l+1}} A_{lm} \quad (2)$$

の値が求まり, 表3に示してある。

## 2° p-f混成効果

簡単な2次の摂動論で,  $5f^2$ 状態のエネルギーの変化を求める。中間状態としての価電子帯のホール状態は, ウランの最近接 $\Gamma$ -ポイント上のp状態が同じ位相をもつものと仮定する。 $5f^2$ 状態のエネルギー変化は

$$V_{pf} = \Delta E \left[ V_{\sigma\sigma} + V_{\sigma\pi} \frac{(pf\pi)}{(pf\sigma)} + V_{\pi\pi} \frac{(pf\pi)^2}{(pf\sigma)^2} \right] \quad (3)$$

$$\Delta E = \chi (pf\sigma)^2 / 6 (E_{5f} - E_p) \quad (4)$$

と書ける。ここで $\chi$ は $\Gamma$ -ポイント当りの価電子帯のホール数であり,  $E_{5f}$ は $5f^2$ 状態のエネルギー準位,  $E_p$ は価電子帯のホールのエネルギー準位であり,  $(pf\sigma)$ と $(pf\pi)$ はSlater-Koster積分である。係数 $V_{ij}$ は点電荷模型による結晶場(1式)と全く同じ型で書ける

$$V_{ij} = \sum_{lm} D_{lm}^{ij} C_{lm}, \quad i, j = \sigma, \pi \quad (5)$$

となる。零以外の $D_{lm}^{ij}$ の値を表3に示した。次に $E_{5f} - E_p = -1\text{eV}$ ,  $(pf\sigma) = 1\text{eV}$ ,  $\chi = 0.1$ とすると $\Delta E = -200\text{K}$ と見積もられる。

表3. 有効結晶場の係数.

l m	$A_{lm}$	$B_{lm}(\text{K})$	$D_{lm}^{\sigma\sigma}$	$D_{lm}^{\sigma\pi}$	$D_{lm}^{\pi\pi}$
0 0			0.717	-1.719	1.082
2 0	14.94	2308.2	-4.266	10.711	-6.463
4 0	643.8	1433.7	3.267	-7.436	4.437
4 4 Re	756.4	1684.5	0.394	-1.605	1.375
Im	-1232.6	-2744.8	-0.675	2.751	-2.357
6 0	-11841.2	-636.6	0.346	0.990	-1.732
6 4 Re	-4571.0	-245.7	-0.570	2.324	-1.991
Im	1984.0	106.7	0.978	-3.984	3.413

### 3° 有効結晶場

$5f^2$ 状態に作用する有効結晶場は上記点電荷模型による結晶場  $V_{pc}$  と p-f 混成項  $V_{pf}$  の和である。但し、 $V_{pc}$  には結晶の共有結合性による効果としてレダクション・ファクター  $z$  をかける。即ち

$$V_{eff} = zV_{pc} + V_{pf} \quad (6)$$

希土類  $\rho = 7$  タイトの場合は  $z \sim 0.4$  であるが、 $U_3X_4$  では  $z = 0.2 \sim 0.3$  程度と思われる。

点電荷模型の結果は一軸性の  $C_{20}$  が最も主要な項で次が  $C_{4\pm 4}$  の項である。しかし、これでは  $U_3X_4$  の磁性の特徴も統合的に説明できない。また常磁性領域での磁気的比熱の温度変化も説明できない。そこで、有効結晶場中  $\Delta E$ ,  $(pf\pi)/(pf\sigma)$ ,  $z$  をフィッティング・パラメーターとして  $U_3As_4$  の比熱<sup>22)</sup> の解析を行った。Curie 温度での磁気的エントロピーが実験値に合う様にパラメーターを決め、その時の温度変化を図6に示した。フィッティング・パラメーターの値は  $\Delta E = -100$  K,  $(pf\pi)/(pf\sigma) = -0.75$ ,  $z = 0.2$  であり、妥当な値である。

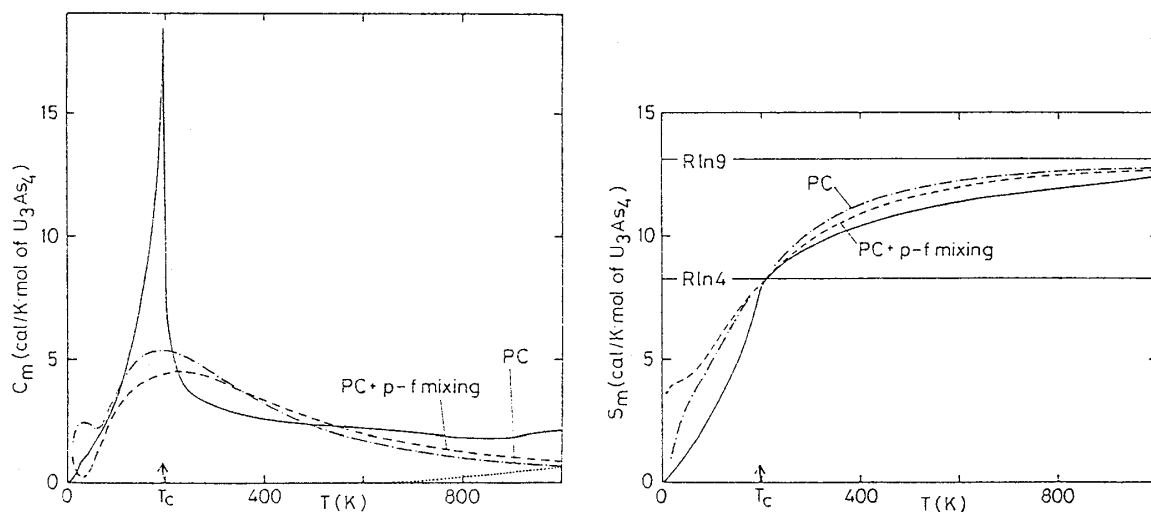


図6. 磁気的比熱 ( $C_m$ ) とエントロピー ( $S_m$ ) の比較。実線：実験値。一点破線：点電荷模型のみ。破線：点電荷模型と p-f 混成項の和。二つれも  $T_c$  でエントロピーが実験値と一致するように決めた。点線：励起状態のみからの寄与。

## §4-2. 強磁性状態の基底状態

強磁性基底状態を単純化した系で考える。まず、各Uイオンの位置に $5f^2$ 状態が点電荷模型で得られる結晶場の下に存在する。 $i$ 番目の位置の状態は全角運動量 $J_2=4$ とその $z$ 成分 $M_{J_2}$ により指定され $|f^2 M_{J_2}; i\rangle$ と表記する。但し量子化軸は各位置での一軸性容易軸、即ち $x, y, z$ 軸のいずれかとする。次にホール状態も考えるが、ホール状態は2種類存在する。オ1は価電子帯のホールであり、これは $\rho$ -ポイントゲンの位置に $p$ -ホールを置く。 $n$ 番目の位置のこの状態もやはり全角運動量 $j$ とその $z$ 成分 $m_j$ で指定され、 $|p m_j; n\rangle$ と表記する。但し $j$ として $3/2$ と $1/2$ の2種類の状態が存在するが、 $p-f$ 混成効果は主に $j=3/2$ に利くので $j=1/2$ は無視する。尚、量子化軸はすべて共通に $\langle 111 \rangle$ 方向にする。オ2は $5f$ -ホールであり、これは $U$ の位置の $5f^1$ で表れる。この状態もやはり点電荷模型による結晶場の下に存在するが、全角運動量 $J_1$ とその $z$ 成分 $M_{J_1}$ により指定され、 $|f^1 M_{J_1}; i\rangle$ と表記する。 $J_1$ として $5/2$ と $7/2$ の2種類の状態が存在するが、 $p-f$ 混成効果の小さい $J_1=7/2$ は無視する。また量子化軸は $5f^2$ と同じに定義してある。

これらの状態間の相互作用として、ウラン- $\rho$ -ポイントゲン最近接間での $p-f$ 混成効果も考える。また点電荷模型による結晶場としては、簡単のため主な項である $C_{20}$ のみを考慮に入れる。次に強磁性基底状態に対する変分関数を導入する。

$$|g.s.\rangle = \sum_i \sum_{M_{J_1}} C(M_{J_1}; i) |f^1 M_{J_1}; i\rangle \pi \sum_{i' \neq i} \sum_{M_{J_2}} a(M_{J_2}; i') |f^2 M_{J_2}; i'\rangle + \pi \sum_i \sum_{M_{J_2}} a(M_{J_2}; i) |f^2 M_{J_2}; i\rangle \sum_n \sum_{m_j} b(m_j; n) |p m_j; n\rangle \quad (7)$$

ここで係数 $a(M_{J_2}; i)$ ,  $C(M_{J_1}; i)$ ,  $b(m_j; n)$ は変分パラメーターで次の様に規格化する。

$$\sum_{M_{J_2}} |a(M_{J_2}; i)|^2 = 1 \quad (8)$$

$$\sum_n \sum_{M_J} |c(M_J; n)|^2 + \sum_n \sum_{m_j} |b(m_j; n)|^2 = 1 \quad (9)$$

実際の計算では6個のUイオンとそれぞれの最近接の8個のア=クトゲン間のp-f混成効果を扱った。pホールのエネルギー準位をエネルギーの原点とし、5f<sup>1</sup>準位は-1eVに存在するとした。変分パラメーターは全エネルギー極小の条件で求めた。

z軸が一軸性容易軸となるU位置に注目すると、計算結果は次の様になる。点電荷模型による結晶場のみの場合はモーメントはz軸方向であり、p-f混成項のみの場合はモーメントが傾きすぎ、即ち<111>方向と<110>方向の中間に向く。次に両者を含めた場合、妥当なパラメーターの値を用いると、実験とよく一致するモーメントの方向が得られる。但しエネルギー的にほぼ縮退した2つの解が存在し、一方はモーメントの大きさはJ=4のものであり、他方はモーメントの大きさの収縮がある。現在、これら2つの解とH-点のホール状態との比較を行っている。但し、H-点のホール状態は4重縮退しており、解析が大変複雑である。予備的な計算結果によると、モーメントの収縮のある解がH-点のホール状態に対応していると思われる。以上の取扱いの最大の欠点はすべてのpホールの状態のエネルギーを同一にした事であり、バンド計算の結果に対応する様なエネルギー準位にしてやると、より実験との良好一致が得られるものと思われる。

## §5. おわりに

ア74ナイド化合物の物性に興味をもたれた方のために、比較的容易に入りこめる最近の総合報告と国際会議の報告書の一覧を以下に記す。また表2は主に5]と7]によった。

### Review Papers and Books

- 1] F.Holtzberg, T.R.McGuire and S.Methfessel; Compounds with Lanthanide and Actinide Elements of Some Special Structure Types, in Landolt-Bornstein, New Series, Group III, Vol. 4 (Springer-Verlag, 1970), p.41.

- 2] The Actinides, Electronic Structure and Related Properties, eds. A. Freeman and J.B. Darby, Jr. (Academic Press, 1974), 2-Volumes.
- 3] L.A. Boatner and M.M. Abraham; Electron Paramagnetic Resonance from Actinide Elements, Rep. Prog. Phys. 41, 87 (1978).
- 4] M.B. Brodsky; Magnetic Properties of the Actinide Elements and their Metallic Compounds, Rep. Prog. Phys. 41, 1547 (1978).
- 5] W. Trzebiatowski; Actinide Elements and Compounds, in Ferromagnetic Materials, ed. E.P. Wohlfarth (North-Holland, 1980) Vol. 1, p.415.
- 6] J. Schoenes; Electronic Transitions, Crystal Field Effects and Phonons in  $UO_2$ , Phys. Rep. 63, 301 (1980).
- 7] J. Schoenes; Electronic Structure of Uranium Monochalcogenides and Uranium Monopnictides, Phys. Rep. 66, 187 (1980).

#### Proceedings

- 8] Proceedings 2nd International Conference on the Electronic Structure of the Actinides, eds. J. Mulak, W. Suski and R. Troc (Wrocław, 1976).
- 9] 3rd International Conference on the Electronic Structure of the Actinides, (Grenoble, 1978), J. de Physique 40, C4 (1979).
- 10] Rare Earths and Actinides, 1977, eds. W.D. Corner and B.K. Tanner (The Institute of Physics, 1978), Conference Series Number 37.
- 11] Crystalline Electric Field and Structural Effects in f-Electron Systems, eds. J.E. Crow, R.P. Guertin and T.W. Mihalisin (Plenum, 1980).
- 12] Crystalline Electric Field and Structural Effects in f-Electron Systems, (Wrocław, 1981), eds. R.P. Guertin, J. Mulak and W. Suski (Plenum, 1982).
- 13] International Symposium on the Physics of Actinides and Related 4f Materials, (Zurich, 1980), Physica 102B, (1980).

#### References

- 1] A.J. Freeman and D.D. Koelling; in 2], Vol. 1, p.51.
- 2] K.N.R. Taylor and M.I. Darby; Physics of Rare Earth Solids, (Chapman and Hall Ltd, 1972).
- 3] L.A. Boatner and M.M. Abraham; Rep. Prog. Phys. 41, 87 (1978).
- 4] S.-K. Chan and D.J. Lam; in 2], Vol. 1, p.1.
- 5] P. Burlet, J. Rossat-Mignod, R. Troc and Z. Henkie; Solid St. Commun. 39, 745 (1981)
- 6] J. Rossat-Mignod, P. Burlet, S. Quezel and O. Vogt; Physica 102B, 237 (1980)
- 7] H. Takahashi et al.; 当報告書.
- 8] T. Suzuki et al.; 当報告書.
- 9] A. Yanase; private communication.
- 10] P.J. Markowski, Z. Henkie and A. Wojakowski; Solid St. Commun. 32, 1119 (1979)
- 11] Z. Henkie, W.R. Johanson, G.W. Crabtree, D.H. Dye, A.J. Arko and C. Bazan; in Actinides 81, (in press).
- 12] Z. Henkie and C. Bazan; Phys. St. Sol. (a) 5, 259 (1971).
- 13] Z. Henkie; Physica 102B, 329 (1980).
- 14] C.F. Buhrer; J. Phys. Chem. Solids 30, 1273 (1969).
- 15] P.J. Markowski, S. Kunii, K. Takegahara, T. Suzuki, Z. Henkie and T. Kasuya; in 12].
- 16] R. Troc, J. Sznajd, P. Novotny and T. Mydlarz; J. Mag. Mat. (in press).
- 17] R. Troc, J. Mulak and W. Suski; Phys. St. Sol. (b) 43, 147 (1971).

- 18) J.Przystawa and E.Praveccki; J. Phys. Chem. Solids 33, 1943 (1972).  
 K.Walasek, J.Przystawa and A.Pawlikowski; J. Phys. C9, 1277 (1976).  
 A.Pawlikowski, B.Kowalczyk and H.Kasprzyk; J. Phys. C12, 2373 (1979).  
 B.Kowalczyk; J. Phys. C13, 5749 (1980).
- 19) K.Takegahara, A.Yanase and T.Kasuya; in 12].
- 20) B.G.Wybourne; Spectroscopic Properties of Rare Earths, (Interscience Pub. 1965).  
 A.J.Kassman; J. Chem. Phys. 53, 4118 (1970).
- 21) J.P.Desclaux and A.J.Freeman; J. Mag. Mag. Mat. 8, 119 (1978).
- 22) A.Alles, B.G.Falk, E.F.Westrum,Jr., F.Grønrold and M.R.Zaki; J. Inorg. Nucl. Chem. 39, 1993 (1977).  
 A.Blaise, R.Lagnier, R.Troc, Z.Henkie, P.J.Markowski and M.J.Mortimer; J. Low Temp. Phys. 39, 315 (1980).
- 23) R.W.G.Wyckoff; Crystal Structures, 2nd ed. (Interscience Pub. 1964), Vol. 2, p.160.